

**АНАЛИЗ УПРУГО-НАПРЯЖЕННОГО СОСТОЯНИЯ ГРАНИЦ НАНОКРИСТАЛЛОВ В
РАМКАХ ДИСКЛИНАЦИОННОГО ПОДХОДА**И.И. Суханов

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. А.Н. Тюменцев
Национальный исследовательский Томский государственный университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 36, 634050
E-mail: suhanii@mail.ru

**ANALYSIS OF THE ELASTIC-STRESSED STATE OF NANOCRYSTALS BORDERS WITHIN
THE FRAMEWORK OF THE DISCLINATION APPROACH**I.I. Sukhanov

Scientific Supervisor: Prof., Dr. A.N. Tyumentsev
Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 36, 634050
E-mail: suhanii@mail.ru

Abstract. *The results of a theoretical analysis of the elastic-stressed state and the distribution of elastic energy in nanostructured metallic materials in the vicinity of nanograin boundaries with a high density of partial disclinations are presented. The features of the distribution of the stress fields of disclination grain-boundary configurations as a function of the size of nanograins are determined taking into account the superposition of these stresses during the screening of disclination pile-ups. It's found that the maximum values of the main components of the stress tensor are achieved only in the disclination planes $P \approx E/25$, and the gradients of these stresses are characterized by the maximum values at the nodal points $\partial P/\partial x \approx 0,08 E \text{ nm}^{-1}$. It's shown that the local energy maxima are a characteristic feature of the distribution of the specific elastic energy of these configurations, which can be the cause of the physical broadening of the nanograin boundaries.*

Введение. Границы зерен являются одним из важнейших элементов дефектной субструктуры поликристаллических материалов. Они определяют многие фундаментальные свойства металлов, такие как, прочность и пластичность. Особую важность они приобретают в процессах пластической деформации разрушения нанокристаллических материалов.

В работе [1] предложена структурная модель субмикрокристалла, учитывающая наличие структурные состояния с высокой континуальной плотностью дефектов (дислокаций и дисклинаций) в объеме и на границах субмикрокристаллов. В этой модели, помимо областей с высокой континуальной плотностью дефектов или высокими значениями кривизны и ротора кривизны кристалла, имеется высокая плотность границ, заполненных плоскими скоплениями непрерывно распределенных частичных дисклинаций. В настоящей работе на основе этой модели в рамках континуального подхода проводится теоретическое исследование особенностей упруго – напряженного состояния и распределения упругой энергии на наномасштабном структурном уровне.

Материалы и методы исследования. В рамках континуального подхода использовалась структурная модель границ нанозерен, в которой дисклинационный заряд распределен и скомпенсирован по контуру зерна гексагональной формы. В качестве носителей такого заряда были выбраны частичные

клиновые дисклинации. Расчет полей напряжений и энергий проводился в программной среде Maple 17 с использованием явного вида тензора напряжений таких дисклинаций [2].

Результаты. Особенности распределения зернограницных дисклинаций определяются двумя условиями (рисунок 1):

- гексагональное зерно задается системой плоских дисклинационных скоплений разных знаков, формирующих дипольные конфигурации;
- пространственное распределение дисклинаций носит нерегулярный характер и описывается тремя областями: последовательное равномерное увеличение/уменьшение расстояния между дефектами (область I/III рисунок 1), эквидистанционная область II с фиксированным расстоянием между зернограницными дисклинациями.

Выбор такого дисклинационного распределения обусловлен наличием высоких значений кривизны и ротора кривизны кристаллической решетки. Величина вектора Франка в ходе вычислительных экспериментов не менялась и составляла $\omega \approx 1^\circ$.

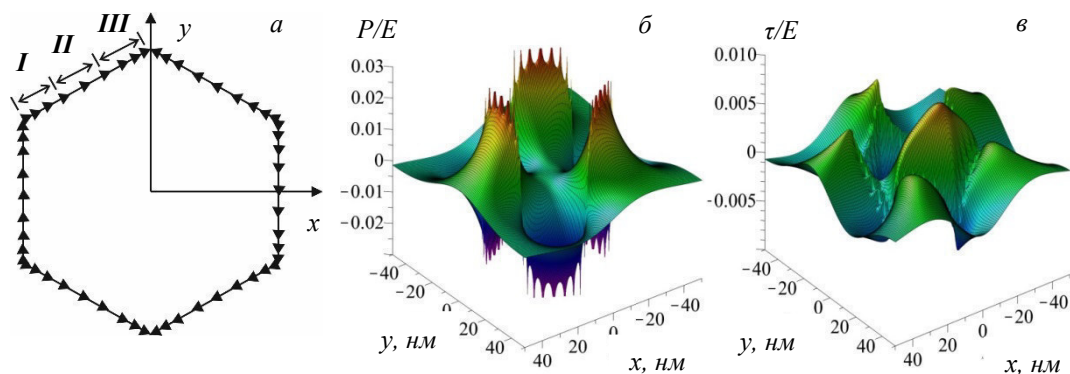


Рис. 1. Схема распределение зернограницных дисклинаций в зерне гексагональной формы (а); пространственное распределение давления $P = (\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz})/3$ (б) и компоненты σ_{xy} тензора напряжений (в) зерна с размерами $R = 60$ нм

Теоретический анализ упруго – напряженного состояния нанозерна размером $R = 100$ нм показал, что поля напряжений характеризуются сложной топологией и локализованы в области расположения частичных дисклинаций (рисунок 2 а). Это является результатом их суперпозиции при экранировке дисклинационных скоплений. Как видно из рисунка 2 а, максимальные значения главных компонент тензора напряжений достигаются в плоскостях залегания дисклинаций $P = Tr(\sigma_{ij})/3 = (\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz})/3 \approx E/25$, при этом градиенты напряжений характеризуются максимальными величинами в узловых точках $\partial P/\partial x \approx 0,08 E \text{ нм}^{-1}$ (E – модуль Юнга). Другая важная особенность поля напряжений нанозерен в рамках данной дисклинационной модели заключается в том что, значительная часть сдвиговых компонент тензора напряжений локализована внутри физического размера зерна (рисунок 2 б).

При уменьшении размера зерна величина полей напряжений уменьшается (рисунок 2 в, г): для нанозерна размером $R = 60$ нм диагональные компоненты тензора напряжений достигают значений $P \approx E/40$, сдвиговые – $\sigma_{xy}/E \approx 0,01$.

Для оценки устойчивости дисклинационной модели дефектной субструктуры границы нанозерна проведен сравнительный анализ распределения удельной упругой энергии в зависимости от его размера. Результаты такого анализа представлены на рисунке 3. Из этих расчетов следует, что в рамках этой модели рассматриваемые конфигурации зернограничных дисклинаций обладают локальным энергетическим максимумом, который является характерной особенностью распределения удельной упругой энергии. Этот максимум, во-первых, можно интерпретировать как своеобразный энергетический барьер, в котором локализуется значительная часть упругой энергии; во-вторых, приводит к увеличению физической ширины границы нанокристалла. Величина максимума зависит от размера зерна и для зерна $R = 60$ нм составляет $(W/L)_{max} = 0,016$ Дж/нм² (рисунок 3 б кривая 1).

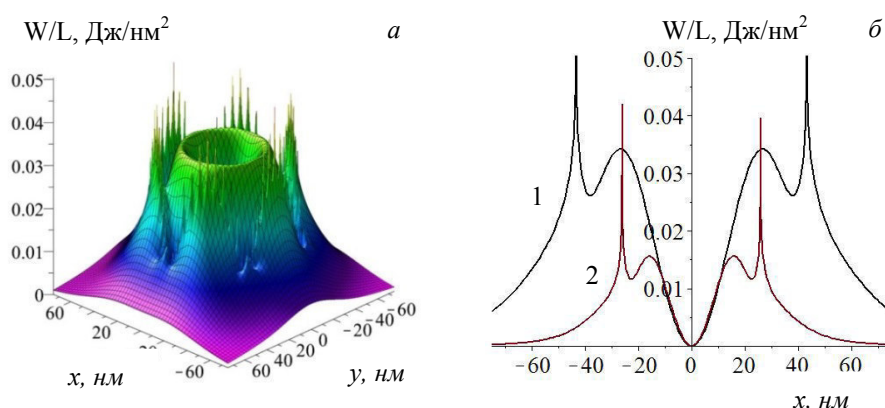


Рис. 2. Пространственное распределение упругой энергии в зерне размером $R = 100$ нм (а) и сравнение его проекций (б) на плоскость $y = 0$ для зерна $R = 100$ нм (кривая 1) и $R = 60$ нм (кривая 2)

Закключение. На основе теоретического анализа упруго – напряженного состояния дисклинационных зернограничных конфигураций выявлены особенности распределения полей напряжений в них в зависимости от размера зерен нанокристаллов как результат суперпозиции этих напряжений в процессе экранировки дисклинационных скоплений. Характер и условия распределения полей напряжений и энергий свидетельствует о важной роли масштабного фактора, который определяет как геометрию границ зерен, так и особенности энергетического максимума. Предполагается, что такой максимум может быть причиной увеличения физической ширины границ зерен нанокристаллов с высокой плотностью частичных дисклинаций.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №17-19-01374).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Тюменцев А.Н. Структурные состояния с высокой кривизной кристаллической решетки в субмикрорекристаллических и нанокристаллических металлических материалах / А.Н. Тюменцев, И.А. Дитенберг // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2011. – Т. 54, № 9. – С. 26–36.
2. Владимиров В. И. Дисклинации в кристаллах / В.И. Владимиров, А.Е. Романов //– Л.: наука, 1986. – 223 с.